

Prof. dr hab. Tadeusz K. Kopeć,

Wrocław, 10.06.2022

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych

im. Włodzimierza Trzebiatowskiego

Polskiej Akademii Nauk

Ul. Okólna 2, 50-422 Wrocław



Ocena osiągnięć Pana dr. Konrada Kapci w związku z postępowaniem o nadanie mu stopnia doktora habilitowanego

Dotychczasowa kariera naukowa Pana dr. Konrada Kapci związana jest z Uniwersytetem Adama Mickiewicza, gdzie w 2009 roku ukończył studia magisterskie broniąc prace pt. „*Uporządkowania ładunkowe i separacje faz w rozszerzonym modelu Hubbarda w granicy zerowej szerokości pasma*” pod kierunkiem promotora: prof. dra hab. Stanisława Robaszkiewicza, a w 2014 obronił pracę doktorską pt.: „*Uporządkowania elektronowe i ich separacje w rozszerzonych modelach Hubbarda*”, również pod kierunkiem prof. dra hab. Stanisława Robaszkiewicza. W latach 2015-2020 pracował na stanowisku adiunkta Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie, Instytucie Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie oraz na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu na Wydziale Fizyki w Zakładzie Teorii Materii Skondensowanej w strukturze Instytutu Spintroniki i Informacji Kwantowej. W latach 2012 do 2021 przebywał na szeregu stażach naukowych w instytucjach zagranicznych takich jak Międzynarodowa Szkoła Studiów zaawansowanych (SISSA) w Trieście (Włochy), a także w Centrum Fizyki Laserów na Swobodnych Elektronach w Hamburgu (Niemcy).

Osiągnięciem naukowym, które jest podstawą wniosku o nadanie Panu Konradowi Kapci stopnia doktora habilitowanego, jest cykl 10 publikacji powiązanych tematycznie w międzynarodowych czasopismach (*Physica A*, *Physical Review B*, *E*, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, *Condensed Matter Physics*, *Journal of Physics: Condensed Matter*, *Nanomaterials*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*), które powstały po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych. Cykl ten opatrzony jest wspólnym tytułem: „*Przemiany metal-izolator, porządek ładunkowy i efekty oddziaływania dalszego zasięgu w wybranych modelach silnie skorelowanych fermionów*”. Publikacje są pracami liczącymi od 1 do 4 autorów, do których dołączone zostały deklaracje poszczególnych twórców odnośnie ich indywidualnego wkładu. Publikacje ukazały się w latach 2016-2022.

1. Ocena osiągnięcia naukowego

We wprowadzeniu do swojego autoreferatu Habilitant podkreśla, że w ostatnich latach jesteśmy świadkami dużego zainteresowania tematyką silnie oddziałujących fermionów. W układach tych mamy do czynienia ze złożonością obserwowanych zjawisk wynikającą z konkurencji pomiędzy różnorodnymi typami porządku elektronowego, co związane jest z występowaniem silnych oddziaływań. Reprezentantami wyżej wymienionych zjawisk mogą być na przykład przemiana metal-izolator, zjawisko nadprzewodnictwa, fazy uporządkowania ładunkowego, orbitalnego i magnetycznego jak również fazy, w których może współistnieć wiele typów uporządkowania ładunkowego i magnetycznego. Należyty opis tych zjawisk musi zatem uwzględnić aspekt kinetyczny przemieszczających się cząstek, jak również oddziaływania pomiędzy nimi. Implikuje to, że modele stosujące się do analizy wyżej wymienionych układów w opisie wielociałowym powinny zawierać część kinetyczną jak również część potencjalną będącą wynikiem oddziaływania między-elektronowego. W tym kontekście Habilitant zauważa, że jednym z najprostszych modeli mogącym posłużyć do opisu wyżej wymienionych układów jest tak zwany model Hubbarda zdefiniowany na sieci, który może być uważany za archetyp dla modeli opisujących układ elektronowy z oddziaływaniem Coulomba (danym parametrem U i energią kinetyczną opisywaną przy pomocy całki przeskoku t). Z uwagi na fakt, że oba wymienione parametry są podobnego rzędu standardowe techniki rachunku zaburzeń oraz przybliżenie pola średniego np. Hartree-Focka mają ograniczone zastosowanie. W tym kontekście Habilitant podkreśla znaczenie metod

nieperturbacyjnych, takich jak dynamiczna teoria pola średniego (DMFT) dla fermionów. Pomimo faktu, że wymieniona metoda nie uwzględnia przestrzennych korelacji to traktuje ściśle oddziaływanie opisywane parametrem U . Wymienione przybliżenie jest równoważne zastąpieniu wyjściowego modelu sieciowego dla fermionów kwantowym modelem pojedynczej domieszki umieszczonej w efektywnym otoczeniu, które może być wyznaczone w sposób samo-zgodny przy użyciu metod numerycznych. Metoda dynamicznego pola średniego jest teorią ścisłą w granicy termodynamicznej oraz granicy nieskończonej wymiarowości, lub równoważnie, w granicy dużej liczby koordynacyjnej dla modelu sieciowego.

Temat prac wchodzących w skład cyklu prezentujących osiągnięcie naukowe dotyczy przemiany fazowej metal-izolator w układach silnie oddziałujących fermionów, fazach z dalekim porządkiem elektronowym, ze szczególnym uwzględnieniem porządku ładunkowego, w oparciu o tak zwany rozszerzony model Hubbarda, który uwzględnia również korelacje międzywęzłowe. Dla opisu korelacji przestrzennych badane układy rozważane były głównie na sieci Bethe, co pozwala na traktowanie otrzymanych wyników jako dobrego przybliżenia dla układów trójwymiarowych. Główne kierunki prowadzonych badań to: analiza przemiany metal-izolator w modelowych układach silnie oddziałujących fermionów z oddziaływaniem między węzłowym, określenie wpływu oddziaływań dalszego zasięgu na własności takich układów, skonstruowanie i badanie diagramów fazowych dla badanych modeli ze szczególnym uwzględnieniem stabilności faz metalicznych oraz określenie wpływu ścisłego traktowania oddziaływania jednowęzłowego na temperaturę przemiany typu porządek-nieporządek. Teoretyczne podejście do wymienionych zagadnień związane było implementacją zaawansowanych metod analitycznych oraz numerycznych. Wyszczególnione w autoreferacie prace **H.1** do **H.10** wchodzące w skład osiągnięcia naukowego rozważają szeroko rozumiane własności układów silnie skorelowanych fermionów w szerokim zakresie różnorodnych parametrów modelu wyjściowego. Pomimo uproszczonego charakteru tych modeli można nimi opisać szereg różnorodnych zjawisk fizycznych. Zaprezentowane rezultaty wnoszą wkład do lepszego zrozumienia fizyki przejścia fazowych w układach z porządkiem dalekiego zasięgu. Należy tutaj podkreślić, że dominująca większość rezultatów zawartych w pracach **H.1** do **H.10** są wynikami ścisłymi badanych modeli sieciowych w granicy dużej liczby koordynacyjnej.

W szczególności, w pracy **H.1** wyznaczono diagram fazowy dla modelu izolatora uporządkowanego ładunkowo koncentrując się na uporządkowaniu typu szachownicowego.

Przeanalizowano także termodynamikę modelu i określono typy przemian pomiędzy fazami uporządkowanymi ładunkowo. Ponadto, zidentyfikowano różnorodne zachowania krytyczne występujące w badanym modelu.

W publikacji **H.2** określono diagram stanu podstawowego dla rozszerzonego modelu Hubbarda w funkcji potencjału chemicznego oraz znaleziono obszary występowania fazy metalicznej uporządkowanej ładunkowo. Ponadto, znaleziono stany izolatora uporządkowanego ładunkowo, w których lokalizacja cząstek występuje na skutek dwóch różnych mechanizmów fizycznych. Zbadano także właściwości wszystkich znalezionych faz wraz z wyznaczeniem oddziałujących gęstości stanów w tych fazach.

W opracowaniu **H.3** określono diagram stanu podstawowego dla rozszerzonego modelu Hubbarda w granicy atomowej w funkcji potencjału chemicznego i koncentracji. Przeprowadzono szczegółową analizę występowania stanów z porządkiem dalekiego zasięgu dla układów o skończonej wymiarowości (wymiar $d=1$, czyli łańcuch $d=2$ sieć kwadratowa, oraz $d=3$ sieć kubiczna przestrzennie centrowana).

W pracy **H.4** określono diagram stanu podstawowego dla rozszerzonego modelu Falicova-Kimballa, który jest uproszczoną wersją modelu Hubbarda, na sieci Bethe. Ponadto, wyznaczono wartości parametrów oddziaływania na węzle U oraz międzywęzłowego W , dla których w dowolnie małej, ale skończonej, temperaturze gęstość stanów na poziomie Fermiego jest niezerowa (stan metaliczny dla zerowej temperatury).

W publikacji **H.5** skonstruowano pełny diagram fazowy dla rozszerzonego modelu Falicova-Kimballa dla ilości cząstek na węzle $n=1$ na sieci Bethe (w granicy dużej liczby koordynacyjnej), na którym występują oprócz faz nieuporządkowanych izolatora i metalu, wiele faz izolatora uporządkowanego oraz fazy uporządkowanego metalu, scharakteryzowanych różnymi właściwościami oddziałującej gęstości stanów. Zbadano również termodynamikę modelu i określono własności wszystkich przemian występujących na diagramie fazowym. Otrzymano także analityczne wyniki na funkcje Greena, gęstość cząstek oddziałujących, przerwę na poziomie Fermiego oraz energię swobodną jako funkcję parametrów modelu.

Z kolei w pracy **H.6** zbadano przebieg ewolucji porządku dalekiego zasięgu wraz ze zmianą stosunku amplitud tunelowania dla spinów „up” do spinu „down” dla asymetrycznego rozszerzonego modelu Hubbarda z parametrem U równym zero. W takim przypadku, jak ustalono, porządek dalekiego zasięgu jest współistnieniem uporządkowania antyferromagnetycznego i ładunkowego.

W publikacji **H.7** zbadano niestandardową zależność temperaturową parametru porządku obsadzeń Δ dla rozszerzonego modelu Falicova-Kimballa dla małych wartości oddziaływań na węzle i między węzłowych za pomocą podejść DMFT oraz Hartree- Focka.

W pracy **H.8** zastosowano szczegółową analizę rozszerzonego modelu Falicova-Kimballa dla gęstości cząstek $n=1$ na sieci Bethe, przybliżeniu Hartree-Focka, w skończonych temperaturach i porównano te wyniki z rezultatami ścisłymi dla tego modelu granicy nieskończonej liczby koordynacyjnej. Określono w tej pracy także jakościowy wpływ różnych typów sieci na obszar występowania faz uporządkowanych - w tym na temperatury krytyczne oraz przemiany typu porządek-nieporządek.

Z kolei w pracy **H.9** przeprowadzono analizę stanu podstawowego dla rozszerzonego modelu Hubbarda w granicy atomowej w funkcji potencjału chemicznego i koncentracji na sieci trójkątnej. Zbadano również termodynamikę modelu w pełnym zakresie parametrów oraz przedyskutowano różnice jakościowe z modelem rozważanym na sieciach hiperkubicznych.

Ostatnia praca zaprezentowanego osiągnięcia naukowego (publikacja **H.10**) poświęcona jest analizie diagramu fazowego dla modeli w granicy atomowej w skończonych temperaturach. Znalaziono różnorodne punkty krytyczne (w tym trójkrytyczne oraz bikrytyczne). Przeanalizowano ich ewolucję wraz ze zmianą parametrów modelu.

W podsumowania można stwierdzić, że otrzymane w pracach **H.1** do **H.10** wyniki mogą mieć istotne znaczenie dla zrozumienia wzajemnych relacji pomiędzy konkurencyjnymi oddziaływaniami w ciele stałym, w szczególności w sąsiedztwie przemiany typu metal-izolator. Wyniki te mogą być także użyteczne do jakościowej analizy danych eksperymentalnych dla rzeczywistych układów wąskopasmowych. Ponadto, wzajemne relacje pomiędzy różnymi rodzajami oddziaływań, które prowadzą do konkurencyjnych typów uporządkowania elektronowych, mają fundamentalne znaczenie dla opisu na przykład nadprzewodników

niekonwencjonalnych, multiferroików oraz szerszej klasy związków zmieszana i naprzemienną walencyjnością. Dyskutowane rezultaty mogą posłużyć także do wytypowania materiałów wąsko pasmowych, których korelacje elektronowe odgrywają bardzo istotną rolę (na przykład w manganitach i ortoferytach) do potencjalnych zastosowań w technice szybkich przełączników lub pamięciach wysokich gęstości zapisu. Habilitant zauważa również, że dyskutowane w pracach składających się na osiągnięcie naukowe modele mogą być zrealizowane w tak zwanych ultra-zimnych gazach atomowych na sieciach optycznych. Układy te są w pełni kontrolowane, to znaczy, że odpowiednio dobierając parametry sieci optycznej można w nich aktywować tylko pożądane oddziaływania i realizować konkretne modele z ustalonymi parametrami oddziaływań.

Podsumowując tą część oceny kandydata jaką stanowi cykl prac będący podstawą osiągnięcia naukowego mogę jednoznacznie stwierdzić, że stanowiące je ważne i oryginalne rezultaty dotyczą bardzo aktualnego problemu fizyki materii skondensowanej. Badania naukowe Pana dr Konrada Kapcia znakomicie wpisują się w eksperymentalno-teoretyczny nurt poszukiwań układów, w których efekty związane z silnymi oddziaływaniami elektronowymi stanowią dominujący składnik rozważanej fizyki.

2. Ocena pozostałych osiągnięć naukowo-badawczych oraz aktywności naukowej, dydaktycznej i popularyzatorskiej

Pan dr Konrad Kapcia w autoreferacie podaje, że całkowita liczba jego publikacji wynosi 52, z czego 15 zostało opublikowanych przed uzyskaniem doktoratu, a 37 w okresie po uzyskaniu stopnia doktora. Baza *Web of Science* podaje również jego *h*-index wynoszący 14, oraz liczbę cytowań prac, których był autorem lub współautorem: 510 w tym liczba cytowań bez auto cytowań w wysokości 229. Na dorobek habilitanta, składają się prace w czasopismach o wysokim wskaźniku *impact factor* takich jak *Physical Review A B i E*, *Physical Review Materials*, *Physical Review Research*, *Scientific Reports* i inne. Prace habilitanta to publikacje, które powstały we współpracy z badaczami z wielu ośrodków na świecie, gdzie Pan Konrad Kapcia odbywał szereg staży naukowych. Wymienić tu należy Międzynarodową Szkołę Studiów Zaawansowanych w Trieście, Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego Polskiej Akademii Nauk w Krakowie, czy też Centrum Badawcze nad Laserami na Swobodnych Elektronach w Hamburgu. Współpracę międzynarodową można

zatem ocenić jako bardzo owocną. Habilitant wygłosił 28 referatów na konferencjach, z czego 8 z nich to były wykłady na zaproszenie. Od 2021 roku Habilitant jest kierownikiem grantu Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej NAWA. Jest on (lub był) wykonawcą w kilku grantach fundowanych przez Narodowe Centrum Nauki NCN (program: OPUS, SONATINA, SONATA ETIUDA oraz PRELUDIUM). Habilitant posiada również bogate doświadczenie dydaktyczne. Prowadził wykłady z matematyki na kierunku fizyka medyczna, biofizyka i technologie komputerowe na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Wykładał również magnetyzm i nadprzewodnictwo dla doktorantów Instytutu fizyki Polskiej Akademii Nauk w Warszawie oraz prowadził laboratoria z technologii informacyjnych na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza, jak również zajęcia laboratoryjne w ramach pracowni fizycznej na tymże Uniwersytecie. Był też opiekunem naukowym szeregu studentów, którzy odbywali praktyki pod jego kierunkiem. Pan dr. Kapcia brał również udział w ciałach kolegialnych poświęconych jakości kształcenia na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Za swoją działalność dydaktyczną zdobył zespołową nagrodę rektora 2 stopnia za osiągnięcia w pracy dydaktycznej w roku 2012 na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Również jego działalność organizacyjna wygląda imponująco. Był członkiem Rady Wydziału Fizyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, siedmiokrotnie wybrany na członka jako przedstawiciel studentów oraz doktorantów. Był też członkiem Senatu UAM, a także Uczelnianej Rady Doktorantów tegoż Uniwersytetu. Zasiadał w Radzie Samorządu Doktorantów Wydziału Fizyki UAM (jako przewodniczący trzykrotnie i wiceprzewodniczący 2 krotnie), a także brał udział w licznych seminariach w ramach Studenckiego Koła Naukowego Fizyków na Wydziale Fizyki UAM (w tym jako prezes oraz kierownik sekcji teoretycznej). Habilitant był również zaangażowany w szereg przedsięwzięć dotyczących popularyzacji nauki. Brał udziału w warsztatach naukowych „Lato z helem” a także w *Turnieju Młodych Fizyków* czy też w *Poznańskim Festiwalu Nauki i Sztuki* i innych przedsięwzięciach.

Podsumowanie

Wszystkie przedstawione do oceny prace naukowe pokazują bardzo dobre opanowanie przez habilitanta technik zaawansowanej teorii układów silnie skorelowanych w tym metod obliczeniowych numerycznych i swobodne posługiwanie się nimi zarówno od strony technicznej jak i fizycznej interpretacji wyników. Prace z obszaru odnoszącego się do modeli silnie oddziałujących fermionów wnoszą istotny wkład do fizyki tych układów, zawierają porządne obliczenia i napisane są w zwięzły i elegancki sposób.

Podsumowując uważam, że dorobek Pana doktora Konrada Kapci jest w zupełności wystarczający dla uzyskania stopnia doktora habilitowanego zgodnie z rozporządzeniem Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dotyczącego kryteriów oceny osiągnięć osoby ubiegającej się o nadanie tego stopnia. Jego osiągnięcia naukowo badawcze, współpraca międzynarodowa a także osiągnięcia dydaktyczne i popularyzatorskie spełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane przy ubieganiu się o stopień doktora habilitowanego. Dlatego też gorąco rekomenduję Komisji Habilitacyjnej wydanie pozytywnej opinii w sprawie nadania panu doktorowi Konradowi Kapci stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki fizyczne.



Tadeusz K. Kopec